

令和 6 年 5 月 21 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01864

研究課題名(和文)アクチノイド化合物のための相対論的電子相関法の開発

研究課題名(英文) Development of relativistic electron correlation method toward actinide compounds

研究代表者

阿部 穰里 (Abe, Minori)

広島大学・先進理工系科学研究科(理)・准教授

研究者番号：60534485

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,400,000円

研究成果の概要(和文)：アクチノイド化合物の電子状態を精密に求めるために、厳密2成分相対論法(X2C法)と多参照摂動論であるCASPT2法に基づいた相対論的電子相関法のプログラム開発を、フリーソフトウェアDIRACを基盤として行った。並列化、RASPT2への拡張、インプット作成補助ツールなどの開発も含め実用的なプログラムを完成させ、web上で無償公開する準備を行った。ベンチマーク計算としてウラニル分子の励起エネルギーを高精度に求め、プログラムの性能を評価した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

アクチノイド化合物の電子状態を理解することは、原子力発電で生じる核廃棄物処理問題に関連して重要であり、安全性の観点からも、理論計算による解明が重要である。しかしアクチノイド化合物の電子状態は相対論と電子相関の影響を強く受けるため、通常の分子の計算と比べて格段に困難である。これを解決するために本プログラムを開発した。本プログラムを用いて様々なアクチノイド原子からなる分子の電子状態の違いを理解することで、アクチノイド分離に用いる配位子の設計に役立てる可能性がある。

研究成果の概要(英文)：To accurately determine the electronic states of actinoid compounds, we developed a relativistic electron correlation program based on the exact two-component relativistic Hamiltonian (X2C) and the multireference perturbation theory (CASPT2), using the free software DIRAC as a foundation. The development included parallelization, extension to RASPT2, and the input assistance tool, resulting in a practical program. We prepared to make this program available for free on the web. As a benchmark calculation, we precisely determined the excitation energies of the uranyl molecule and evaluated the performance of the program.

研究分野：理論化学

キーワード：アクチノイド化合物 CASPT2 相対論 量子化学 電子状態

### 1. 研究開始当初の背景

アクチノイド化合物は、福島第一原発事故で生じた燃料デブリや、一般の原発でも生成される放射性廃棄物の構成物である [1]。福島第一原発の廃炉、あるいは放射性廃棄物からアクチノイドを分離、回収するためにも、アクチノイド化合物の物性の把握が重要である。しかしウラン以外のアクチノイド元素は人工的にしか合成されず、また放射性物質で危険であることから、その物性解明の研究は限られている。加えて放射性物質であるため、その危険性を考えると理論計算で解明できることが望ましい。しかしアクチノイド化合物の電子状態の記述には、高精度な相対論と電子相関、特に静的電子相関を取り扱う多配置の考慮が必要であると考えられる。なぜならアクチノイドはエネルギーが近い 5f、6d 軌道が化学結合に関与してくるので、電子状態が擬縮退し複雑になりうるからである。

実践的なアクチノイド化合物計算においては、スピンフリー (SF) な相対論ハミルトニアン の枠組みで分子軌道 (MO) を構成し CCSD、MRCI、MRPT2 法などで電子相関を考慮した後、いくつかの SF な電子状態の線形結合で SO 相互作用を考慮する方法が一般的である。しかしスピン軌道 (SO) 相互作用が大きい場合、4 成分 Dirac 法や厳密 2 成分 (X2C) 法など SO が入ったハミルトニアンで直接 SCF を解いて 1 電子スピン軌道を得る場合と、どのように結果が異なるのか不明である。あるいは ADF プログラムのように、ZORA などの 2 成分法で DFT を用いて計算する方法も実用的と言えるが、DFT でアクチノイド化合物の多配置性や開殻状態が十分に考慮できるのかが不明である。

SO 相互作用を含む 1 電子スピン軌道を SCF の段階から決定するような、高精度な相対論的多配置電子相関プログラムには、以下のものが開発されている。MCSCF、GASCI、FSCSD 法は相対論的フリーソフトウェアの DIRAC に内包されている [2]。QCMaquis プログラムでは、DIRAC の分子軌道積分を用いて密度行列繰り込み群 (DMRG) 法の計算が可能である [3]。またフリーソフトウェア BAGEL では、4 成分ハミルトニアンにおいて MCSCF や CASPT2、NEVPT2、ic-MRCI+Q の計算が実施可能である。また Chronus では X2C 法に基づいた、MRCI や MRPT2 の開発が行われている。さらに本課題の代表者である阿部は、4 成分 Dirac 法で計算する CASPT2 プログラムを UTChem プログラムの積分を用いた形式で、2006 年に作成していた [4]。しかしながらいずれの方法も、SO 相互作用を含む分子軌道を使うため、空間軌道ではなくスピン軌道(スピノール)ベースで電子相関を取り込み、電子相関における計算コストが大きく、原子や対称性が高い小規模の分子への適用のみが報告されていた。

### 2. 研究の目的

そこで本研究では、DIRAC の分子軌道積分を用いる CASTP2 プログラム開発を行い、アクチノイド化合物に対して計算可能な、より実用的な高精度相対論的電子相関プログラムの確立を目指した。DIRAC は毎年新しいバージョンがリリースされる開発アクティビティの高いソフトウェアであり、さまざまな高精度相対論的ハミルトニアンにも対応している [2]。一方 CASPT2 法は、多配置電子相関理論の中でも、精度を保ちつつ計算コストが低い手法であり、非相対論・擬相対論の枠組みで非常によく用いられている。これらを組み合わせることで、より大きな分子系に適用できるプログラムが生成できると考えられる。ただし CASCI-CASPT2 では、電子配置の数が完全活性空間 (CAS) の増加によって組み合わせ論的に増加するために、計算可能な活性空間のサイズに限界があるという課題が存在する。そこで配置の生成に対して制限を設ける RASCI-RASPT2 法も併せて開発した。さらに従来の活性空間よりも大きな軌道空間を用いることができる DMRG 法に基づいた CASPT2 プログラム開発も検討した。

### 3. 研究の方法

CASPT2 法ではまず参照関数を決定する必要があるが、ここでは CASCI 法を採用する。CASCI 法では、多配置状態に寄与する軌道空間を CAS と設定し、CAS の中でとりうる全ての電子配置に対して CI 法で配置の重み係数を決定する。さらに CASPT2 法では、動的電子相関を考慮するため、占有軌道側に inactive、被占有軌道側に secondary 軌道空間を拡張し、これらの空間を含む電子励起の影響を摂動的に考慮する (図 1)。

一方 RASPT2 法では、CAS をさらに RAS1、RAS2、RAS3 と 3 分割し、これらの軌道空間内の電子数やホール数に制限を設けて配置の数を減らす RASCI を参照波動関数とする (図 2)。プログラムの実装としては、該当する配置だけで CI 計算を行うよう CASCI プログラムを変更すればよく、CASPT2 の個所の変更は不要である。アクチノイドのように、擬縮退する 5f、6d 軌道の数が多く、多配置に寄与する軌道の種類が多い場合は、CAS に含めたい軌道数が多すぎて計算が不可能な場合がある。この時は、RASCI-RASPT2 法の適用が功をなす場合がある。

DMRG 法は CASCI 法と同様にすべての配置に対して CI を行うが、異なる数学的アルゴリズムを用いることで、計算コストに対する CAS の大きさの依存性を低減する手法である。DIRAC をベースとした DMRG プログラムの新規開発と、既存の DMRG プログラムである QCMaquis

を用いて、DMRG-CASPT2 を実現するための CASPT2 側の改変を行った。

また非相対論の枠組みでは、CASPT2 の参照関数は CASCI よりも CASSCF が用いられるが、SO を含む場合の CASSCF は計算コストが大きい。そのため、今回は CASSCF を行わず、HF の MO を使った CASCI を参照関数とする。HF で得られる活性空間の仮想軌道の記述の不完全さを補うために improved virtual orbital (IVO) 法で仮想軌道の改善を行っている。

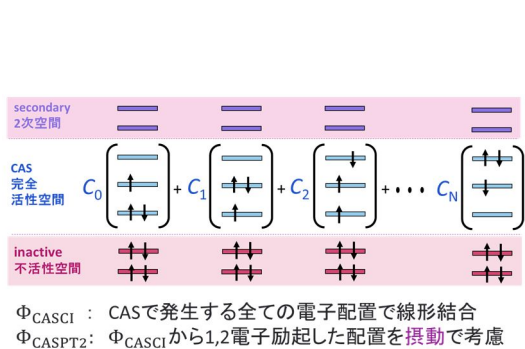


図 1 . CASCI、CASPT2 法 の概念図

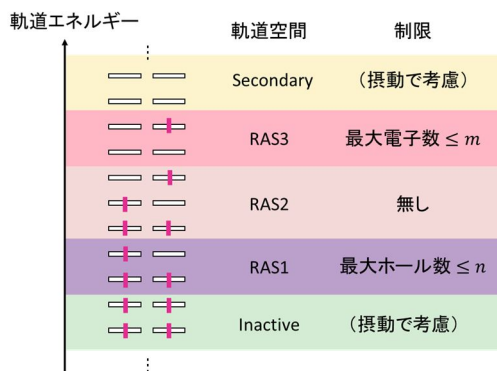


図 2 . RASPT2 法 の概念図

#### 4 . 研究成果

##### ( 1 ) CASCI-CASPT2 プログラムの公開

本プログラムは、学术论文への掲載が決まり次第 GitHub の機能を用いて、無償でダウンロード可能になる予定である [5]。これに先行して、CASPT2 計算用の入力作成をサポートする GUI プログラムはすでに一般公開している [6]。本研究で開発した入力作成ツールでは、DIRAC で出力される分子軌道のデータを表形式で分かりやすく表示し、どの軌道を RAS、inactive、secondary 等の空間軌道に所属させるかを、クリックで決定できるプログラムである。またあらかじめ必要となる計算機のメモリ量を表示させることで、ユーザーの計算機資源に応じた軌道空間の選択ができるようになっている。(図 3、4)

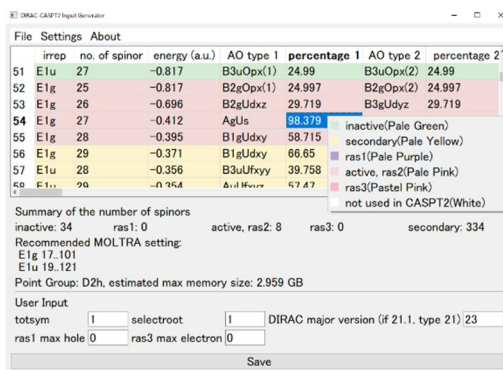


図 3 . 入力作成ツールの Screen shot

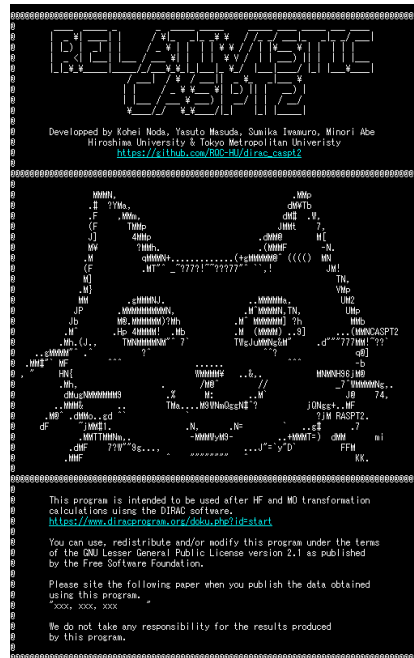


図 4 . CASPT2 プログラムの Screen shot

##### ( 2 ) CASCI-CASPT2 計算の並列化効率

実用的な計算を目指すために CASCI-CASPT2 の並列化プログラムを実装し、並列化によって計算時間がどう変わるかを測定した。UO<sub>2</sub><sup>2+</sup>分子の CASCI と CASPT2 エネルギーについて、1、2、4、8、16、32、64、128、256 コアを用いた MPI 並列計算を行い、計算時間を評価した。我々のプログラムには MPI と OpenMP の両方が実装されているが、OpenMP を用いた予備テストでは並列化効率が低かったため、MPI 並列計算のみを行った。使用した基底関数は、ウランに dyall.cv2z、酸素に 6-31+G\* であり、分子対称性は C<sub>32h</sub> 二重群を考慮した。閉殻 HF 計算は DIRAC21 プログラムを用いて X2C ハミルトニアンで行った。CASPT2 軌道空間には、inactive を 26 スピノール、CAS を 18 スピノール、secondary を 264 スピノールとして構成した。これらの inactive と secondary 空間は DIRAC のデフォルト設定に従って選択され、-20 から +10E<sub>h</sub> のエネルギー範囲の軌道を含めた。CAS は 12 電子を含む 18 スピノールで構成され、0<sub>g</sub> 既約表現の基底状態に対して CASCI-CASPT2 計算を行った。1~32 コアを使用する計算は単一ノードで実行され、それ以上のコア数を必要とする計算では、ノードレベルの並列化が実

装され、各ノードは最大 32 コアを収容した。これらの計算に使用された計算ハードウェアは、AMD E7763 CPU で構成され、各コアには 1.875 GB のメモリが割り当てられた。計算には、分子科学研究所 (IMS) 内の計算科学研究センター (RCCS) にあるスーパーコンピュータを使用した。

図 5 に示すように、CASCI 計算と CASPT2 計算の計算時間の対数は、16 コアと 64 コアの CASCI 計算と 64 コアの CASPT2 計算で観測された異常を除き、コア数の対数に対してほぼ直線的に減少した。このテストでは CAS のサイズが比較的小さいため、対角化などの行列代数演算よりも、1 電子積分と 2 電子積分から行列要素を構成する方が計算時間を多く消費する。このため、行列要素の構築は効率的に並列化できるため、32 コアの CASCI 計算で 77%、CASPT2 計算で 96% など、高い並列化効率を得られた。しかし、一部のコア数の計算では、計算時間の異常性を示しており、詳細は不明であるが、データ共有通信(MPI-all reduced)の時間が想定を超えて長くかかることがあったようだ。

今回はコア数の依存性を調べるためのベンチマーク計算であったので、比較的小さな空間軌道を用いており、必要とする 1 コア当たりのメモリ数が 2GB とそれほど大きくなかった。しかし MPI 並列では、CASPT2 計算に必要なメモリの量がコア数分だけ乗じて必要となる。したがって多くのメモリが必要となる大きな軌道空間を用いた CASPT2 計算を実施したい場合には、ユーザーが使うことのできる計算機資源(メモリの量や計算機が搭載しているコア数)によって並列数に制限を受ける可能性が高い。しかしながら、少ないコア数の並列化においても計算時間の削減は達成できているので、計算機資源に応じた並列化計算の実施は強く推奨される。

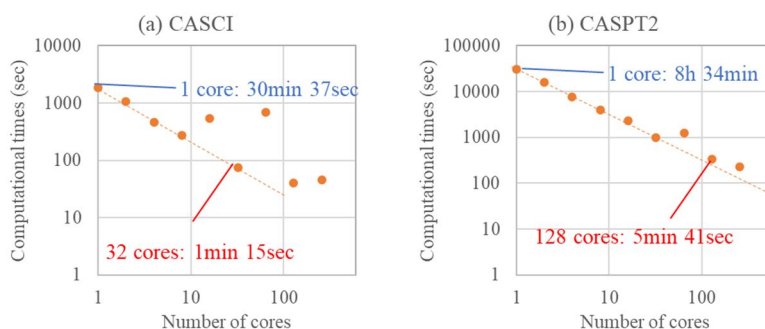


図 5 . 計算時間と並列化コア数の関係

### (3) $\text{UO}_2^{2+}$ 分子の RASPT2 を用いた高精度計算

本プログラムを用いた高精度な応用計算として、気相の  $\text{UO}_2^{2+}$  分子に対する、基底・励起状態のポテンシャル曲線を RASPT2 法による計算で求めた。基底関数には高精度な dyall-cv4z 基底を用い、軌道空間には inactive : 30、RAS1 : 12、RAS2 : 0、RAS3 : 16、secondary : 860 スピノールを用いた大規模計算を実施した。RAS1 は最大 2 つのホールを許容、RAS3 は最大 2 電子の占有を許容し、RAS 空間全体には 12 電子が占有する制限付き配置となっている。得られたポテンシャル曲線を図 6 に示す。また多くの先行研究で計算されている、 $R = 1.708 \text{ \AA}$  での垂直励起エネルギーを、過去の様々な方法論による報告値と比較して図 7 に示す。

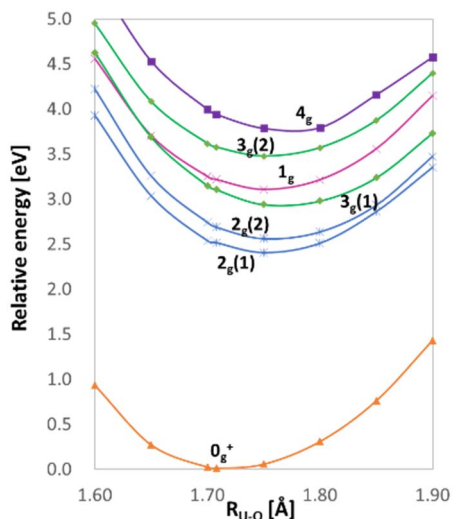


図 6 .  $\text{UO}_2^{2+}$  分子のポテンシャル曲線

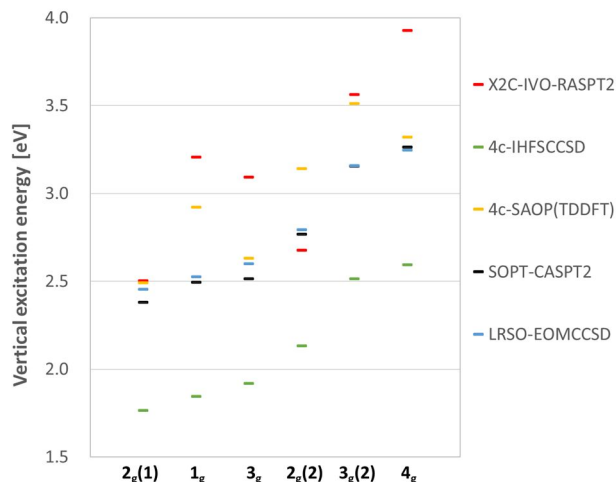


図 7 . 各方法論で求めた垂直励起エネルギーの比較

おおむね滑らかなポテンシャル曲線が得られており、またこれまで報告されている他の方法論の計算値と比較すると、垂直励起エネルギーの値が大きくなる傾向が見られた。今後は RAS

を拡張しながら、RAS 選択による依存性や収束性を調査したうえで、電子相関と相対論効果が UO<sub>2</sub><sup>2+</sup> 分子に与える影響を議論する。またこの系以外にも、フェナントロリン配位子を 2 つ含むアクチノイド化合物の CASPT2 計算も行っており、f-f 遷移に対して実験値と良好な一致を示した (投稿論文準備中)。さらにウラン化合物の同位体分別係数の計算においても、本プログラムを応用した CASPT2、RASPT2 計算を実施している [7]。したがって、小さい分子だけでなく、ある程度実用的な分子の計算に対応可能なプログラム開発が完成していると言える。

#### (4) DMRG-CASPT2 プログラムの開発

DMRG 法については、DIRAC プログラムの積分を用いた DMRG プログラム自体の新規開発と、DMRG が出力する密度行列を用いて計算する CASPT2 側の開発の二点について進めた。一つ目については、非相対論的な DMRG プログラム [8] を相対論バージョンにするという大幅な修正が必要であった。軽い分子のベンチマーク計算においては、DMRG-CI と CCSD のエネルギーが近くなったため、プログラムは正しく機能しているようであったが、少し系が大きい場合にはまだエラーが残っていた。一方、相対論的 DMRG プログラムとして、すでに一般公開されている QCMAquis を使うことも可能であるため、QCMAquis に接続可能な CASPT2 プログラムの開発にも取り組んだ。DMRG では CI 係数ではなく、密度行列が計算可能量であるため、1~4 次の密度行列を読み込みながら CASPT2 計算が可能になるように修正した。ただし DMRG と CASPT2 では、密度行列の定義が異なるため、互換性を持たせるための変換が必要であった。さらに各プログラムで対称性や軌道のナンバリングのアルゴリズムが異なるため、結果的に大幅な修正が必要となった。軽い分子系では CASCI-CASPT2 と DMRG-CASPT2 のエネルギーの一致が見られたが、CASCI と DMRG で非ゼロの密度行列の個数に不一致が見られるなど、まだ問題が残っている。実用レベルの計算を実現するためには、現在直面している問題の解明と、さらなるプログラミングが重要となるが、引き続きこの研究に取り組んで必ず解決する。

#### [Reference]

- [1] B. Grambow et al. Ten years after the NPP accident at Fukushima : review on fuel debris behavior in contact with water. *Journal of Nuclear Science and Technology* 2022, 59:1, 1-24.
- [2] DIRAC: Program for Atomic and Molecular Direct Iterative Relativistic All-electron Calculations. Project website: <https://diracprogram.org>
- [3] S. Battaglia et al., An efficient relativistic density-matrix renormalization group implementation in a matrix-product formulation. *J. Chem. Theory Comput.* 2018, 14, 2353-2369.
- [4] M. Abe, et al. The relativistic complete active-space second-order perturbation theory with the four-component Dirac Hamiltonian. *J. Chem. Phys.* 2006, 125, 234110.
- [5] [https://github.com/RQC-HU/dirac\\_caspt2](https://github.com/RQC-HU/dirac_caspt2)
- [6] [https://github.com/RQC-HU/dcaspt2\\_input\\_generator](https://github.com/RQC-HU/dcaspt2_input_generator)
- [7] A. Sato, et al., Electron correlation effects on uranium isotope fractionation in U(VI)-U(VI) and U(IV)-U(VI) equilibrium isotopic exchange systems. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2024, accepted, DOI: 10.1039/D4CP01149J.
- [8] N. Nakatani, Block implements the DMRG algorithm for quantum chemistry / finding site-ordering automatically. <https://github.com/naokin/Block>



## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Sato Ataru, Bernier-Latmani Rizlan, Hada Masahiko, Abe Minori	4. 巻 307
2. 論文標題 Ab initio and steady-state models for uranium isotope fractionation in multi-step biotic and abiotic reduction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Geochimica et Cosmochimica Acta	6. 最初と最後の頁 212 ~ 227
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.gca.2021.05.044	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Yoshida Akira, Abe Minori, Hada Masahiko	4. 巻 125
2. 論文標題 Density Functional Study on Compounds to Accelerate the Electron Capture Decay of $^7\text{Be}$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6356 ~ 6361
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.1c01491	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mitra R., Prasanna V. S., Ruiz R. F. Garcia, Sato T. K., Abe M., Sakemi Y., Das B. P., Sahoo B. K.	4. 巻 104
2. 論文標題 Towards CP-violation studies on superheavy molecules: Theoretical and experimental perspectives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.104.062801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計22件（うち招待講演 8件/うち国際学会 9件）

1. 発表者名 岩室 寿美果, 波田 雅彦, 阿部 穰里
2. 発表標題 DIRACプログラムを基盤とした相対論的CASPT2プログラムの開発
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田玲、波田雅彦、中谷直輝、阿部穰里
2. 発表標題 厳密2成分相対論法に基づく密度行列繰り込み群の新規プログラム開発
3. 学会等名 日本放射化学会第66回討論会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阿部穰里
2. 発表標題 アクチノイド化合物のための相対論的電子相関プログラムの開発
3. 学会等名 日本放射化学会第66回討論会(2022) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野田紘平、阿部穰里
2. 発表標題 相対論的多配置摂動論に基づく内殻励起エネルギー計算プログラムの開発
3. 学会等名 2022年日本化学会中国四国支部大会広島大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 増田康人、阿部穰里
2. 発表標題 DMRGとの接続に向けた密度行列形式の相対論的多配置摂動論のプログラム開発
3. 学会等名 2022年日本化学会中国四国支部大会広島大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高山優希、阿部穰里
2. 発表標題 速度論的同位体分別解明にむけた水銀還元反応の理論的探索
3. 学会等名 第20回同位体科学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤有汰留、阿部穰里、波田雅彦
2. 発表標題 平衡系のウラン同位体分別における電子相関および配位環境に関する理論的研究
3. 学会等名 第20回同位体科学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤有汰留、阿部穰里、波田雅彦
2. 発表標題 相対論的量子化学計算に基づくウラン同位体分別に関する理論的研究
3. 学会等名 2022 重元素化学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 戸田智渚、阿部穰里
2. 発表標題 シッフモーメントに対する電子状態項のより厳密な表現の検討
3. 学会等名 2022 重元素化学研究会
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 増田 康人、阿部穰里
2. 発表標題 重元素分子の電子状態計算に向けた高精度相対論的多参照摂動論(DRMG-CASPT2)プログラムの開発
3. 学会等名 2022 重元素化学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ashley Brown, Yvonne Roebbert, Ataru Sato, Minori Abe, Stefan Weyer, Rizlan Bernier-Latmani
2. 発表標題 Fractionation of U isotopes during bacterial reduction
3. 学会等名 20th Swiss Geoscience Meeting, Lausanne 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Rizlan Bernier-Latmani, Ashley Brown, Margaux Molinas, Zezhen Pan, Yvonne Roebbert, Ataru Sato, Minori Abe, and Stefan Weyer
2. 発表標題 Uranium: a subsurface contaminant and a paleo-redox proxy
3. 学会等名 12th International Symposium Geochemistry of the Earth's Surface: Earth system interactions on a changing planet (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Minori Abe, Ataru Sato, Masahiko Hada
2. 発表標題 Theoretical calculation of isotope fractionation in biotic uranium reduction
3. 学会等名 REHE 2020/2022 13th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Minori Abe, Satoshi Toda, Yasuto Masuda Kohei Noda
2. 発表標題 New representation of electronic terms for Schiff moment in molecules
3. 学会等名 Searches for Electric Dipole Moments: From Theory to Experiment (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Abe, A. Sato, M. Hada
2. 発表標題 Uranium isotope fractionation in biological reduction based on the relativistic quantum chemical calculations
3. 学会等名 ACS Fall meeting 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Minori Abe, Takashi Tsutsui, Jorgen Ekman, Bhanu Das, Masahiko Hada
2. 発表標題 Electronic enhancement factor for nuclear Schiff moment in heavy-element molecules
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ataru Sato, Minori Abe, Masahiko Hada
2. 発表標題 Ab-initio modeling of uranium isotope fractionation in biotic reduction
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Abe, A. Sato, M. Hada
2. 発表標題 Relativistic calculations of isotope fractionation in uranium chemical compound
3. 学会等名 Norway-Japan symposium on theoretical and experimental chemistry of complex systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Abe, A. Sato, M. Hada
2. 発表標題 Theoretical study of uranium isotope fractionation for 64 U compounds
3. 学会等名 Hiroshima University & National Taiwan University Joint Symposium on Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阿部 穰里
2. 発表標題 電子と原子核の相互作用に関連する3つの理論的研究
3. 学会等名 2021年度日本放射化学会 第 65 回討論会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿部 穰里
2. 発表標題 6,5,4価ウラン化合物の電子状態と同位体効果の理論計算
3. 学会等名 第 4 回ナノ材料科学・応用研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阿部 穰里
2. 発表標題 ウラン化合物における相対論を含む量子化学計算の実験との整合性検討
3. 学会等名 2021年度 専門研究会「アクチノイド物性化学とその応用」(招待講演)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	中谷 直輝 (Nakatani Naoki) (00723529)	東京都立大学・理学研究科・教授  (22604)	
研究分担者	波田 雅彦 (Hada Masahiko) (20228480)	京都府立大学・生命環境科学研究科・特任教授  (24302)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	野田 紘平 (Noda Kohei)	広島大学・先進理工系科学研究科・研究補助員	
研究協力者	増田 康人 (Masuda Yasuto)	広島大学・先進理工系科学研究科・博士前期課程学生	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スイス	EPFL			
ドイツ	Hannorver University			